Sada příkladů z kvantové fyziky č.2

Ke studiu kvantové mechaniky je potřeba se seznámit s některými matematickými sturkturami studovanými ve funkcionální analýze: lineární operátory, střední hodnoty komutátory, vlnové funkce a další. V následujících příkladech si přiblížíme některé jejich vlastnosti.

Na příští cvičení přineste vypočítané příklady[1] 1.1 c)-e), 2.2, 3*, 4 c)-d),5 b)-c), 6*,7.1,7.2

Příklad č.1
Vlnové funkce
1) Mohou následující funkce být vlnovými funkcemi na daném intervalu? Pokud ano, určete normalizační konstantu.
a) $\psi_1(x) = ax$, na $[0, +\infty)$
b) $\psi_2(x) = bx^2$, na $(-\infty, \infty)$
c) $\psi_3(x) = c\sin\left(\frac{n\pi}{2l}(x-l)\right)$, na intervalu $[-l, l]$, kde $n \in \mathbb{N}$
d) $\psi_4(x) = \begin{cases} d(a^2 - x^2) \text{ pro } |x| < a \\ 0 \quad \text{jinak} \end{cases}$, na $(-\infty, \infty)$
e) $\psi_5(x) = ge^{-x^2}$ na intervalu $(-\infty, \infty)$
Pozn.: v příkladu e) můžete potřebovat tzv. Gaussův integrál
2) Jaká je pravděpodobnost nalezení elektronu v poli vodíkového obalu ve vzdálenosti $[r, r + \mathrm{d}r]$ od jádra v čase t_0, jehož vlnová funkce je dána jako

$$\psi(x, y, z) = Ae^{-\frac{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}{a_0}}. \tag{1}$$

Pozn.: transformujte do sférických souřadnic, nezapomeňte na Jakobián

Příklad č.2
de Broglieho hypotéza
1) čemu se je úměrná pravděpodobnost nalezení částice popsané de Broglieho vlnou

$$\psi_{\vec{p},E}(\vec{x}, t) = A\exp\left(\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{x} - Et)\right) \tag{2}$$

v intervalu $(x_1, x_2) \times (y_1, y_2) \times (z_1, z_2)$?
2) určete vlnovou délku a frekvenci de Broglieho vlny pro molekulu O_2 za pokojové teploty a pro částici vážící $10\mu g$ a rychlosti zvuku.

Příklad č.3
Lineární operátory
1) Nechť $\psi(x) : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$. Které z následujících operátorů jsou lineární?
a) $\hat{A}\psi(x) = c\psi(x)$, kde $c \in \mathbb{C}$
b) $\hat{B}\psi(x) = \psi^2(x)$
c) $\hat{C}\psi(x) = \overline{\psi(x)}$

[1] u příkladů označených hvězdičkou přineste ty příklady, které nebyly vypočítány na cvičení

d) $\hat{T}_a\psi(x) = \psi(x-a)$
e) $\hat{X}\psi(x) = x\psi(x)$
f) $\hat{P}\psi(x) = -i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi(x)$
g) $\hat{K}\psi(x) = -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x)$
h) $\hat{H}\psi(x) = \left[-\frac{\hbar}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\right]\psi(x)$, kde m je konstanta a $V(x)$ je reálná funkce

2) Mějme dva lineární operátory $\hat{A}$, $\hat{B}$, jsou následující výrazy také lineární?
$\hat{A}+\hat{B}$, $\hat{A}\hat{B}$, $\exp(\hat{B}) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\hat{B})^n}{n!}$
3) Čemu se rovná $(\hat{A}-\hat{B})(\hat{A}+\hat{B})$?
4) $\hat{K} = \left(x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^2$, $\hat{L} = \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}x\right)^2$. Platí, že $\hat{K} = \hat{L}$?

Příklad č.4
Střední hodnota operátoru, střední kvadratická odchylka operátoru
Pro vlnovou funkci

$$\psi(x) = C\exp(-Ax^2 + Bx)$$

spočtěte a)$\langle\hat{X}\rangle_\psi$, b)$\langle\hat{P}\rangle_\psi$, *c)*$\langle\hat{X}^2\rangle_\psi$, *d)*$\Delta_\psi\hat{X}$.

Příklad č. 5
Fourierova transformace
Mějme vlnový balík v 1D v čase $t=0$ definovanou jako

$$\psi(x) = C\exp(-Ax^2 + Bx)$$

a) Nalezněte koeficienty $\psi(p)$ rozvoje $\psi(x)$ do rovinných vln $e^{\frac{ipx}{\hbar}}$, z nich lze pak vyjádřit $\psi(x)$ jako

$$\psi(x) = \int \mathrm{d}p\psi(p)e^{\frac{ipx}{\hbar}}.$$

b) Ukažte, že střední hodnota operátoru hybnosti $\langle\hat{P}\rangle_\psi = \int \overline{\psi(x)}\hat{P}\psi(x)\mathrm{d}x$ se dá vypočítat pomocí hybnostní reprezentace $\psi(p)$ jako

$$\langle\hat{P}\rangle_\psi = \int \mathrm{d}p\cdot p|\psi(p)|^2$$

c) Jakou dimenzi má vlnová funkce $\psi(x)$? Jakou dimenzi má $\psi(p)$?

Příklad č.6
Komutátory
komutátor operátorů $\hat{A}, \hat{B}$ je definován následujícím způsobem: $[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$.
a) spočítejte následující komutátory ze znalosti $[\hat{A},\hat{B}]$ (v případě 3 a 4 vyjádřete komutátor pomocí jednoduchých komutátorů dvou operátorů)
$[\hat{A},\hat{A}]$, $[\hat{B},\hat{A}]$, $[\hat{A}+\hat{B},\hat{C}]$, $[\hat{A}\hat{B},\hat{C}]$, $[\hat{A},\hat{B}\hat{C}]$
b) Nechť $\hat{X}\psi(x) = x\psi(x)$, $\hat{P}\psi(x) = -i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi(x)$. Spočtěte $[\hat{X},\hat{X}]$, $[\hat{X},\hat{P}]$,$[\hat{X}^2,\hat{P}]$,$[\hat{X},\hat{P}^2]$.
c) Ukažte, že $[\hat{X},\hat{P}^n] = ni\hbar\hat{P}^{n-1}$

Příklad č.7
Delta funkce
Delta funkce $\delta(x)$ je speciální příklad tzv. *zobecněné funkce*, (více se dozvíte v 01MMF/01RMF), která je definována jako lineární funkcionál následujícím způsobem:

$$\delta(f(x)) = \int_a^b \mathrm{d}x\,\delta(x)f(x) = \begin{cases} f(0) & \text{pokud } 0 \in [a,b] \\ 0 & \text{jinak.} \end{cases}$$

Méně formálně tedy lze říci, že $\delta(x) = 0$ pro $x \neq 0$ a $\delta(0) = \infty$.
1) Vypočítejte následující výraz:

$$\int_{-3}^{1} \mathrm{d}x\delta(x+2)(x^3 - 3x^2 + 2x - 1)$$

2) Dokažte následující vlastnosti δ funkce:
a) $x\delta(x) = 0$, b) $\delta(x)$ je sudá funkce, c) $\delta(cx) = \frac{1}{|c|}\delta(x)$.
3) Ukažte, že následující reprezentace δ funkce jsou platné:
a) $\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int \mathrm{d}k e^{ikx}$
b) $\delta(x) = \lim_{a\to 0} \frac{1}{a\sqrt{\pi}} e^{-\frac{x^2}{a^2}}$